АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ КВАДРАТОВ МОДУЛЕЙ ЭЛЕМЕНТОВ S-МАТРИЦЫ С ПОМОЩЬЮ УГЛОВ ЭЙЛЕРА

Л.Ж. Паланджянц, В.Б. Тлячев, В.А. Козлов

Майкопский государственный технологический университет, г. Майкоп

Адыгейский государственный университет, г. Майкоп

Армавирский государственный педагогический университет, г. Армавир

Рассматривается алгоритм решения двухуровневых задач квантовой механики, основанный на теории мультипликативного интеграла и его асимптотическом представлении. С целью более полной ясности частично воспроизводятся результаты из работы [9].

1. Общие сведения

Известно, что задача о переходах между стационарными состояниями двухуровневой квантовой системы, вызываемой возмущением, которое задается произвольной функцией времени $V(t)$, описывается уравнением:

$$\begin{aligned} a(t) &= -a(t)\cdot iV(t)\sigma_1 e^{i\omega t\sigma_3}, \\ a(t_0) &= (1{,}0), \end{aligned} \tag{1}$$

где $a(t) = (a_1(t), a_2(t))$; $a_1(t)$ и $a_2(t)$ − соответственно амплитуды состояний 1 и 2.

В матричном виде система (1) запишется в виде:

$$a'(t) = a(t)\cdot iV(t)\cdot\begin{pmatrix} -\sin\omega t & \cos\omega t \\ \cos\omega t & \sin\omega t \end{pmatrix}$$

Общее решение системы (1) можно записать через матрицу рассеяния

$$a(t) = a(t_0)\cdot S(t_0, t)$$

Амплитуды состояний записываются через элементы S - матрицы:

$$a_1(t) = a_1(t_0)S_{11}(t_0,t) + a_2(t_0)S_{21}(t_0,t) = \cos\phi e^{i(\varphi+\psi)t};$$
$$a_2(t) = a_1(t_0)S_{12}(t_0,t) + a_2(t_0)S_{22}(t_0,t) = i\sin\phi e^{i(\varphi+\psi)t}.$$

Вероятность перехода из состояния 1 в состояние 2 в момент времени t определяется по формуле:

$$w(t,t_0) = |a_2(t)|^2 = \sin^2\Phi$$

Следовательно, решение задачи о вычислении вероятности перехода между состояниями полностью определяется значением угла Φ, для вычисления которого используется представление S - матрицы мультипликативным интегралом.

В рассматриваемой задаче S - матрица – унимодулярная унитарная матрица второго порядка, поэтому ее можно параметризировать с помощью углов Эйлера φ, ϕ и ψ:

$$S = e^{-i\varphi\sigma_3}e^{-i\Phi\sigma_1}e^{-i\psi\sigma_3},$$

где $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ - матрицы Паули.

В работах [1-4] был предложен геометрический метод решения нестационарных задач квантовой механики на основе применения теории мультипликативного интеграла и частичного использования сферической геометрии [5-7].

С помощью мультипликативного интегрирования по частям удается построить приближение *S*-матрицы произведением произвольного числа унитарных унимодулярных матриц второго порядка. Определенным образом проведенное мультипликативное интегрирование по частям позволяет выделить циклический процесс, который упрощает процедуру приближения S-матрицы в виде произведения произвольного числа унитарных унимодулярных матриц второго порядка. Кроме того, удается в общем случае указанного приближения вычислить точное значение матричных элементов, что не представлялось возможным методами, указанными в работах [1-4].

Кроме того, после каждого цикла приближения строится последовательность соответствующих вероятностей перехода от одного состояние системы к другой, и исследуются свойства этой последовательности.

2. Мультипликативное интегрирование по частям и вычисление вероятности перехода.

Пусть $P(t) = i\begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ \overline{p}_{12} & -p_{11} \end{pmatrix}$, где $p_{mj} = p_{mj}(t)$ – гладкие функции от $t \in [0,+\infty),\ m, j = 1,2.$

Разложим по P(t) базису матриц Паули:

$$P(t) = i(\theta_1\sigma_1 + \theta_2\sigma_2 + \theta_3\sigma_3),$$

где $\theta_1 = (p_{12} + \overline{p}_{12})/2,\ \theta_2 = (p_{12} - \overline{p}_{12})/2i,\ \theta_3 = p_{11},\ \theta_k \in R, k = 1,2,3.$

Рассмотрим мультипликативный интеграл

$$S = \overset{\cup}{\int} E + P(t)dt, \qquad (13)$$

соответствующий дифференциальному уравнению $S' = SP(t)$.

Матрицу S, S(0)=E называют S-матрицей.

Укажем процесс мультипликативного интегрирования по частям, в результате которого интеграл (13) представится как произведение произвольного числа унитарных унимодулярных матриц второго порядка. Такие произведения называют приближением S-матрицы произведением унитарных унимодулярных матриц второго порядка.

Напомним формулу мультипликативного интегрирования по частям (13) [5-7]:

$$\overset{\cup}{\int} E + P(t)dt = \overset{\cup}{\int} E + C(P(t) - C^{-1}C')C^{-1}dt \cdot C,$$

где C = C(t) – неособая матрица второго порядка. Возьмем $C(t) = i\theta_3\sigma_3$. Тогда интеграл (13) запишется в виде

$$\overset{\cup}{\int} E + P(t)dt = \overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{1,1}\sigma_1 + \theta_{2,1}\sigma_2)dt \cdot \exp(i\int\theta_3\sigma_3 dt), \qquad (14)$$

где

$$\theta_{1,1} = \theta_1 \cos 2\int\theta_3 dt - \theta_2 \sin\int\theta_3 dt, \qquad (15)$$

$$\theta_{2,1} = \theta_1 \sin 2\int\theta_3 dt + \theta_2 \cos\int\theta_3 dt \qquad (16)$$

Продолжим интегрирование по частям, взяв $C(t) = i\theta_{1,1}\sigma_1$:

$$\overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{1,1}\sigma_1 + \theta_{2,1}\sigma_2)dt = \overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{2,2}\sigma_2 + \theta_{3,2}\sigma_3)dt \cdot \exp(i\int\theta_{1,1}\sigma_1 dt), \qquad (17)$$

где

$$\theta_{2,2} = \theta_{2,1}\cos 2\int\theta_{1,1}dt, \qquad (18)$$

$$\theta_{3,2} = \theta_{2,1}\sin 2\int\theta_{1,1}dt. \qquad (19)$$

Теперь проинтегрируем еще раз, взяв $C(t) = i\theta_{3,2}\sigma_3$:

$$\overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{2,2}\sigma_2 + \theta_{3,2}\sigma_3)dt = \overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{1,3}\sigma_1 + \theta_{2,3}\sigma_2)dt \cdot \exp(i\int \theta_{3,2}\sigma_3 dt), \tag{20}$$

где

$$\theta_{1,3} = -\theta_{2,2}\sin 2\int \theta_{3,2}dt, \tag{21}$$

$$\theta_{2,3} = \theta_{2,2}\sin 2\int \theta_{3,2}dt. \tag{22}$$

Таким образом, из равенств (16), (19), (22), получаем

$$\overset{\cup}{\int} E + P(t)dt = \overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{1,3}\sigma_1 + \theta_{2,3}\sigma_2)dt \cdot \exp(i\int \theta_{3,2}\sigma_3 dt)\exp(i\int \theta_{1,1}\sigma_1 dt)\exp(i\int \theta_3\sigma_3 dt).$$

На этом первый цикл интегрирования заканчивается, поскольку произведение

$$S_1 = \exp(i\int \theta_{3,2}\sigma_3 dt)\exp(i\int \theta_{1,1}\sigma_1 dt)\exp(i\int \theta_3\sigma_3 dt)$$

представляет собой унитарную унимодулярную матрицу второго порядка.

Оставшийся интеграл $\overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{1,2}\sigma_1 + \theta_{2,3}\sigma_2)dt$ имеет вид интеграла (17) и поэтому процесс интегрирования можно продолжить. Очевидно, что дальнейшее интегрирование $\overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{1,2}\sigma_1 + \theta_{2,3}\sigma_2)dt$ сводится к интегрированию $\overset{\cup}{\int} E + i(\theta_{1,1}\sigma_1 + \theta_{2,1}\sigma_2)dt$ с той разницей, что вместо коэффициентов $\theta_{1,1}$ и $\theta_{2,1}$ будут $\theta_{1,3}$ и $\theta_{2,3}$, связь между которыми следует из равенств (20), (21), (23), (24):

$$\theta_{1,3} = -\theta_{2,1}\cos 2\int \theta_{1,1}dt \cdot \sin 2\int \theta_{3,2}dt,$$

$$\theta_{2,3} = \theta_{2,1}\cos 2\int \theta_{1,1}dt \cdot \cos 2\int \theta_{3,2}dt.$$

Дальнейшие вычисления показывают, что интеграл (13) запишется в виде бесконечного произведения

$$\overset{\cup}{\int} E + P(t)dt = \prod_{k=0}^{\infty} \exp(i\int \theta_{1,2k+1}\sigma_1)\exp(i\int \theta_{3,2k}\sigma_3), \tag{24}$$

где

$$\theta_{1,2k+1} = -\theta_{2,2k-1}\cos 2\int \theta_{1,2k-1}dt \cdot \sin 2\int (\theta_{2,2k-1}\sin 2\int \theta_{1,2k-1}dt)dt,$$

$$\theta_{2,2k+1} = \theta_{2,2k-1}\cos 2\int \theta_{1,2k-1}dt \cdot \cos 2\int (\theta_{2,2k-1}\sin 2\int \theta_{1,2k-1}dt)dt,$$

$$\theta_{3,2k} = \theta_{2,2k-2}\cos 2\int \theta_{3,2k-2}dt \cdot \sin 2\int (\theta_{1,2k-1}dt)dt,\ \theta_{3,0} = \theta_3,\ k = 1,2,...n.$$

Отметим, что произведение 2n+1 матриц произведения (24) можно записать в виде произведения n троек матриц типа (23). При этом матрицы типа $\exp(i\int \theta_{3,2k}\sigma_3 dt),\ k = 2,...,n-1$ представляются в виде произведения двух равных множителей, что и обеспечивает указанное разложение:

$$S_1 = \exp(\frac{i}{2}\int \theta_{3,2}\sigma_3 dt)\exp(i\int \theta_{1,1}\sigma_1 dt)\exp(i\int \theta_3\sigma_3 dt),$$

$$S_k = \exp(\frac{i}{2}\int \theta_{3,2k}\sigma_3 dt)\exp(i\int \theta_{1,2k-1}\sigma_1 dt))\exp(\frac{i}{2}\int \theta_{3,2k-2}\sigma_3 dt)$$

$$S_n = \exp(i\int \theta_{3,2n}\sigma_3 dt)\exp(i\int \theta_{1,2n-1}\sigma_1 dt)\exp(\frac{i}{2}\int \theta_{3,2n-2}\sigma_3 dt).$$

Следовательно, интеграл (13) запишется в виде

$$\overset{\cup}{\int} E + P(t)dt = \overset{\cup}{\int} E + \begin{pmatrix} 0 & -\overline{\omega}_{2n+1} \\ \omega_{2n+1} & 0 \end{pmatrix} dt \cdot S_n S_{n-1} \cdots S_1, \qquad (25)$$

где

$$\omega_{2n+1} = \rho_{2n+1} \exp(2i \int \theta_{3,2n} dt),$$

$$\rho_{2n+1} = \rho_{2n-1} \cos 2 \int \theta_{3,2n} dt \cos 2 \int \theta_{1,2n-1} dt,$$

$$\rho_1 = \theta_1 \sin 2 \int \theta_3 dt + \theta_2 \cos 2 \int \theta_3 dt) \cos 2 \int \theta_{1,1} dt.$$

В приближенных вычислениях интеграл $\overset{\cup}{\int} E + \begin{pmatrix} 0 & -\overline{\omega}_{2n+1} \\ \omega_{2n+1} & 0 \end{pmatrix} dt$ следует оценить, подобрав соответствующую унитарную унимодулярную матрицу второго порядка, а к полученному произведению (25) можно применить формулу вычисления вероятности перехода и результаты теоремы 1 из [9].

Литература

1. *Ростокин В.И., Колкунов В.А.* Асимптотические решения задачи о взаимодействии атома с внешним полем. /Физика газоразрядной плазмы. Сб.МИФИ под ред. Е.С.Трехова. – М.: Атомиздат, 1969. – В.2. – С. 31-52.
2. *Ростокин В.И., Колкунов В.А.* Геометрический метод решения нестационарных задач квантовой механики. /Физика газоразрядной плазмы. Сб.МИФИ под ред. Е.С. Трехова. – М.: Атомиздат, 1969. – В.2. – С. 53-61.
3. *Ростокин В.И.* К адиабатической теории возмущений. /Атомные столкновения. Сб. МИФИ под ред. Ю.А.Вдовина. – Атомиздат. – 1969. – С. 102-110.
4. *Ростокин В.И.* К теории S-матриц второго порядка. /Автореферат канд. диссер. – М., 1970. – 15 с.
5. *Гантмахер Ф.Р.* Теория матриц. – М.: Наука, 1967. – 1967. –576 с.
6. *Мантуров О.В.* Мультипликативный интеграл.// Проблемы геометрии, 1990.– Т.22. – С. 167-215.
7. *Паланджянц Л.Ж.* Геометрия мультипликативного интеграла. – Майкоп: Качество, 1997. – 94 с.
8. *Андронов И.К., Окунев А.К.* Курс тригонометрии. – М.: Просвещение, 1967. – 648 с.
9. *Паланджянц Л.Ж., Тлячев В.Б.* Геометрический метод вычисления квадратов элементов S-матрицы. // Труды ФОРА. – 2006. - № 11. – С. 1-7.

The algorithm calculation the quadrates modules of S-matrix by means of Euler angles

L.G. Palandgyantz, V.B. Tlyachev, A.V.Kozlov

The quadrate elements of the S-matrix are calculated with the help of the product integral theory and the basic expression in spherical triangle.

